



TITLE:

格子統計の新しい近似法

AUTHOR(S):

小川, 泰

CITATION:

小川, 泰. 格子統計の新しい近似法. 物性研究 1971, 17(1): 17-36

ISSUE DATE:

1971-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88359>

RIGHT:

格子統計の新しい近似法

京大・理 小 川 泰

(9 月 1 3 日 受 理)

§ 1. 序

各格子点に働く分子場に分布と相関があり，それを感じて直接には相互作用のないスピン間にも相関が生じる。そのふるまいは分子場の分布，相関とつじつまがあっている筈である。

われわれはこのような観点から格子統計の近似を行ったが¹⁾，第一原理から導けるように改良を試みた結果，第一近似（前報では Mamada-Takano 近似²⁾（以下 MT と略）に相当する第零近似と呼んだ近似段階の改良。以下序数は一つつづれる）は Bethe 近似³⁾と一致した。第二近似も改良され，Ising 模型の転移点についてみると，正方格子の場合には Kikuchi 近似⁴⁾（以下 K と略）には僅かに及ばないが，bcc の場合には K 近似よりも良い結果を与える。

1. 高次近似も独立粒子的描像に基いている。
2. 後述（§ 4）の有効分布関数の方法によって直観的に式をたてられ，そのことが変分法による基礎をもつ。

等の特色がある。

ここでは LPL (loose packed lattice : 2 種類の sublattice に分けた時同じ sublattice に属する格子点が隣り合わない格子) の場合に話を限って，近似法の説明に重点をおく。CPL (close packed lattice : fcc, hcp, 三角格子のように対等な 2 種類の sublattice に分けられない格子) の場合については別の機会にゆずる。また磁場のない Ising 模型のみ扱い，剛体球格子気体についても稿を更めて報告する。

§ 2. 定 式 化

1st. neighbour (以下 1. n. と略) の間にのみ相互作用がある LPL の Ising 模型について説明する。

格子を A, B 2 つの sublattice に分け，それぞれに属するスピンを σ 及び

小川 泰

τ と名付けるとハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \sigma_i \tau_j = -J \sum_{i \in A} \sum_{\delta} \sigma_i \tau_{i+\delta}, \quad (1)$$

(i, j は $1..n$)

但し, $\sigma_i = \pm 1$, $\tau_j = \pm 1$, \sum_{δ} は $1..n$ についての和を表わすものとする。

分配関数は

$$\begin{aligned} Z &\equiv \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{\tau\}} \exp \left[K \sum_{i \in A} \sum_{\delta} \sigma_i \tau_{i+\delta} \right] \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{\tau\}} \prod_{i \in A} \exp \left[K \sigma_i V_i(\{\tau\}) \right] \\ &= \sum_{\{\tau\}} \prod_{i \in A} \left[2 \operatorname{ch} K V_i(\{\tau\}) \right], \end{aligned} \quad (2)$$

但し, $K \equiv \beta J$, $\beta \equiv 1/k_B T$,

$$V_i(\{\tau\}) \equiv \sum_{\delta} \tau_{i+\delta} \quad (3)$$

である。

z を $1..n$ の個数, L を格子点総数とすれば, $V_i(\{\tau\})$ は, $-z$, $-z+2$, \dots , $z-2$, z の $(z+1)$ 通りの値のみをとりうるから,

$$Z = \sum_{\{\tau\}} \prod_{n=0}^z \left[2 \operatorname{ch} (z-2n) K \right]^{\frac{L}{2} f_n(\{\tau\})}, \quad (4)$$

という形に書き表わすことができる。

ここで $\{\tau\}$ についての和を組み換えて,

$$\begin{aligned} \alpha &= \mathcal{A}(\{\tau\}), \\ \beta &= \mathcal{B}(\{\tau\}, \alpha), \end{aligned} \quad (5)$$

.....

等の変数についての和に変換する。具体的には後で述べるが, 例えば B-sub-lattice の磁化

$$\alpha \equiv \frac{2}{L} \sum_{i \in B} \tau_i, \quad (6)$$

等である。

寄与の等しい項を集めて整理すれば,

$$Z = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \cdots \sum_{\zeta} [C(\alpha, \beta, \dots, \zeta)]^{\frac{L}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left[2 \operatorname{ch}(z-2n)K \right]^{(\frac{L}{2})} g_n(\alpha, \beta, \dots, \zeta)} \quad (7)$$

という形になり, $L \rightarrow \infty$ でこの和の最大項 ($\alpha = \alpha_0, \beta = \beta_0, \dots, \zeta = \zeta_0$) の寄与が圧倒的であるとして, 自由エネルギーは

$$F = -\frac{L}{2} k_B T \{ \ln C(\alpha_0, \beta_0, \dots, \zeta_0) + \sum_{n=0}^{\infty} g_n(\alpha_0, \beta_0, \dots, \zeta_0) \ln [2 \operatorname{ch}(z-2n)K] \}, \quad (8)$$

となる。

この式の導出まで形式的には厳密であるが, 問題は次の二つの要請を充すことに移る。

[I] C, g_n を矛盾なく求める。

[II] $\{\tau\}$ のみに依存する C, g_n を環境とする σ スピンのふるまいも, α_0, β_0, \dots とつじつまのあう平均値をもつ。

例えば磁化について

$$m_{\sigma} = \pm m_{\tau} \quad (J \geq 0)$$

(\mathcal{A} として (6) をとったとき)

C の求め方については Appendix で述べるが, $\alpha \dots$ 等の変数を完全にはとれないことから近似になる。

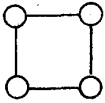
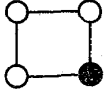
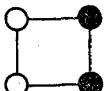

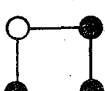
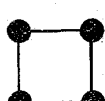


§ 3 第一近似 = Bethe 近似

一番簡単に $\alpha = \mathcal{A}(\{\tau\})$ として磁化 (6) のみとる第一近似が Bethe 近似になっていることを示そう。

正方格子の場合を考える。+1, -1 の状態に対応して, 図では○及び●で示す。

ある σ スピンに着目すると, 直接相互作用のある相手は一辺が 2. n. の正方形頂点に位置する 4 個の τ スピンで, 4 スピン全体としての状態は $2^4 = 16$ 通

りあるが、対称性を考慮すればK近似で扱うように第1図の6種類である。この6状態の実現比をK近似流に $z_1 \sim z_6$ と名付けると、(但しK近似では一辺

	正方形	確率	多重度
(1)		z_1	1
(2)	 etc.	z_2	4
(3)	 etc.	z_3	4
(4)	 etc.	z_4	2
(5)	 etc.	z_5	4
(6)		z_6	1
	点	確率	多重度
(1)		x_1	1
(2)		x_2	1

第 1 図

が1.n.の正方形についてであるが), (7), (8)式の g_n との関係は,

$$\left\{ \begin{array}{l} g_0 = z_1, \\ g_1 = 4z_2, \\ g_2 = 4z_3 + 2z_4, \\ g_3 = 4z_5, \\ g_4 = z_6 \end{array} \right. \quad (10)$$

である。また1個のスピンの状態もK近似流に x_1, x_2 と命名すれば、4個の τ スピンの部分としての1スピンと考えて、

$$\begin{aligned} x_1 &= z_1 + 3z_2 + 2z_3 + z_4 + z_5, \\ x_2 &= z_6 + 3z_5 + 2z_3 + z_4 + z_2, \\ x_1 + x_2 &= 1 \end{aligned} \quad (11)$$

という関係式が得られる。

また、 C をこの x_i, z_i のみで表わすために Appendix で述べるように $Hijmans-de Boer$ (以下 HdB と略) の方法を拡張して、

$$\begin{aligned} \ln C &= 3[x_1 \ln x_1 + x_2 \ln x_2] - [z_1 \ln z_1 + 4z_2 \ln z_2 \\ &\quad + 4z_3 \ln z_3 + 2z_4 \ln z_4 + 4z_5 \ln z_5 + z_6 \ln z_6] \end{aligned} \quad (12)$$

が得られ、要請 [I] がみたされた。独立変数は5個であるが、(11)の初めの二式の代りに Lagrange 未定乗数 $\ln p, \ln q$ を導入し、(12)を使った(7)を z_1, \dots, z_6 で変分すると、

$$\left\{ \begin{aligned} z_1 &= p^4 \operatorname{ch} 4K \\ z_2 &= p^3 q \operatorname{ch} 2K \\ z_3 &= z_4 = p^2 q^2 \\ z_5 &= p q^3 \operatorname{ch} 2K \\ z_6 &= q^4 \operatorname{ch} 4K \end{aligned} \right. \quad (13)$$

が得られる。 p, q は (11) の規格化条件

$$\begin{aligned} 1 &= x_1 + x_2 \\ &= (p^4 + q^4) \operatorname{ch} 4K + 4pq(p^2 + q^2) \operatorname{ch} 2K + 6p^2 q^2 \end{aligned} \quad (14)$$

を使って磁化 m で表わされるべきものである。

$$\begin{aligned} m &\equiv x_1 - x_2 \\ &= (z_1 - z_6) + 2(z_2 - z_5), \end{aligned} \quad (15)$$

小川 泰

$$= (p^4 - q^4) \operatorname{ch} 4K + 2pq(p^2 - q^2) \operatorname{ch} 2K. \quad (16)$$

一方要請 [II] から σ スピンの磁化も $J \geq 0$ に従って $m_\sigma = \pm m$ の筈であるが、 σ のふるまいは 5 種類の外場が与えられたときの 1 スピン問題として簡単に求まり、

$$m = (z_1 - z_6) \operatorname{th} 4K + 4(z_2 - z_5) \operatorname{th} 2K, \quad (17)$$

$$= (p^4 - q^4) \operatorname{sh} 4K + 4pq(p^2 - q^2) \operatorname{sh} 2K, \quad (18)$$

であることがわかる。

従って (16) と (18) から

$$p = q, \quad (19)$$

又は、

$$(p^2 + q^2)(\operatorname{ch} 4K - \operatorname{sh} 4K) + 2pq(\operatorname{ch} 2K - 2 \operatorname{sh} 2K) = 0, \quad (20)$$

となって、(14) とから、

$$p = q = 1 / (2 \operatorname{ch} K), \quad (21)$$

及び

$$\left. \begin{array}{l} p \\ q \end{array} \right\} = \frac{e^K \{ (e^{2K} - 1) \sqrt{e^{2K} + 2} \pm e^{2K} + 1 \} \sqrt{e^{2K} - 2}}{4 [8(e^{4K} - 2)]^{1/4} (e^{4K} - 1)} \quad (22)$$

が求まる。

(22) の二根が一致する条件

$$e^{2K} = 2 \quad (23)$$

が転移点を与え、Bethe 近似と一致している。勿論これを求めるだけならば (20) で $p = q$ とおいても求まる。

自由エネルギーは

$$F = -\frac{L}{4} k_B T \left[(1+m) \ell_n \frac{(1+m)^3}{(2p)^4} + (1-m) \ell_n \frac{(1-m)^3}{(2q)^4} \right] \quad (24)$$

$$= \begin{cases} -2L k_B T \ln \operatorname{ch} K, & \text{for } T > T_c \\ -L k_B T \ln \frac{(e^{4K} - 1)^2}{2e^{2K}(e^{4K} - 2)} & \text{for } T < T_c \end{cases} \quad (25)$$

であり、解は Bethe 近似と完全に一致しているが、この近似の直観的描像に基いていろいろの意味づけをしたり、物理量を直観的に求めたり出来る。

例えば、short range order, ω , は

$$\omega \equiv \langle \sigma_i \tau_{i+\delta} \rangle \quad (26)$$

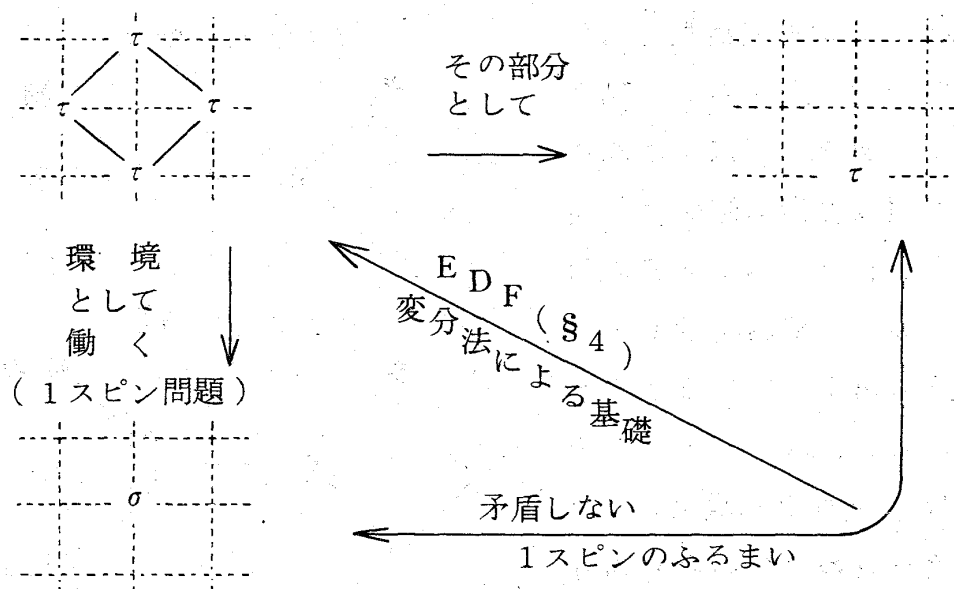
は勿論、自由エネルギーから内部エネルギーを求めても計算できるが、今の描像から

$$\omega = (z_1 + z_6) \operatorname{th} 4K + 2(z_2 + z_5) \operatorname{th} 2K$$

$$= \begin{cases} \frac{\operatorname{sh} 4K + 2 \operatorname{sh} 2K}{\operatorname{ch} 4K + 4 \operatorname{ch} 2K + 3} = \operatorname{th} K, & \text{for } T > T_c \\ \frac{(e^{8K} - 3e^{4K} - 2)}{(e^{4K} - 1)(e^{4K} - 2)}, & \text{for } T < T_c \end{cases} \quad (27)$$

という具合に計算できる。

この近似のプロセスを図式的に示したのが第2図である。



第 2 図

小川 泰

一般に 1.n. 数 z 個の LPL では (12) に代って,

$$\ell_n C = (z-1) [x_1 \ell_n x_1 + x_2 \ell_n x_2] - [z_1 \ell_n z_1 + \dots] \quad (28)$$

また (15), (18) は

$$m = \sum_{n=0}^{\lfloor z/2 \rfloor} \frac{z-2n}{z} \binom{z}{n} (pq)^n (p^{z-2n} - q^{z-2n}) \operatorname{ch} (z-2n) K \quad (29)$$

$$= \sum_{n=0}^{\lfloor z/2 \rfloor} \binom{z}{n} (pq)^n (p^{z-2n} - q^{z-2n}) \operatorname{sh} (z-2n) K \quad (30)$$

と一般化され, $p = q$ が重根となる条件から,

$$e^{2K_c} = \frac{z}{z-2} \quad (31)$$

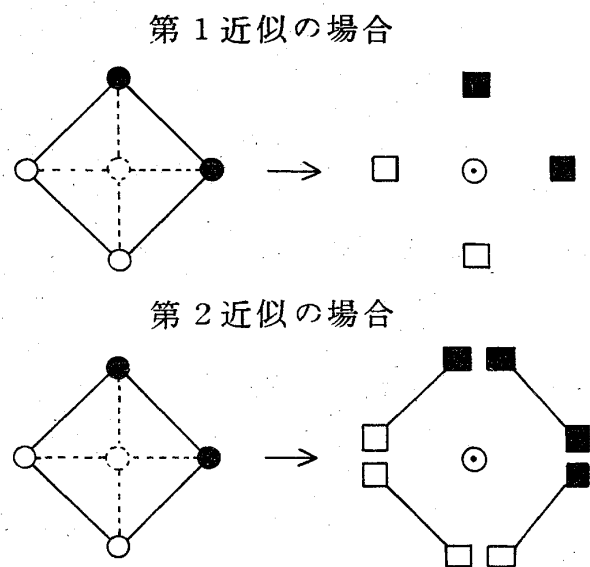
が求まり, この場合も Bethe 近似であることがわかる。自由エネルギーはこのとき,

$$F = -\frac{L}{4} k_B T \left[(1+m) \ell_n \frac{(1+m)^{z-1}}{(2p)^z} + (1-m) \ell_n \frac{(1-m)^{z-1}}{(2q)^z} \right] \quad (32)$$

である。

§ 4 有効分布関数 (E.D.F.)

(13) 式の p, q は未定乗数を通じて導入されたが, 結果をみると第 3 図のように正方形を 4 頂点と内部に分解し, その頂点要素に関する因子としての p, q と, 内部要素に関する因子としての双曲関数 (1 スピン分配関数に由来している) の積とみなせる。 p, q は 1 スピンの分布関数 x_1, x_2 , 自身とは異なり, 4 スピン分布関数を表わすための有効分布関数 (EDF と略) とでも呼ぶべき



第 3 図

ものになっている。

また双曲関数因子を落した近似が MT 近似になっており，前報でのわれわれの近似で双曲因子がつかなかったのは変分関数として (8) 式のうちの前の項のみをとったからであり，今回この点が系統的に改良された。

一般に，(11) に対応する

$$x_i = \sum_j \lambda_{ij} y_j \quad (33)$$

という関係があるとき，(8) 式に対応する

$$\sum_i \alpha_i x_i \ln x_i - \sum_j \beta_j y_j \ln y_j + \sum_j \beta_j y_j F_j \quad (34)$$

を y_j で変分する際に Lagrange 法により

$$(\ln p_i)(x_i - \sum_j \lambda_{ij} y_j) = 0, \quad (35)$$

という形の項を加えて変分すれば

$$y_j^{\beta_j} = F_j^{\beta_j} \prod_i p_i^{\lambda_{ij}}, \quad (36)$$

となり，このようなとき一般に EDF が存在する。

p_i は (35) あるいは (33) で決めるわけであるが，閉じた図形を開くのではない分解の際には EDF は分布関数自身であったり，又は重複部分の分布関数の逆数であったりして簡単になる。

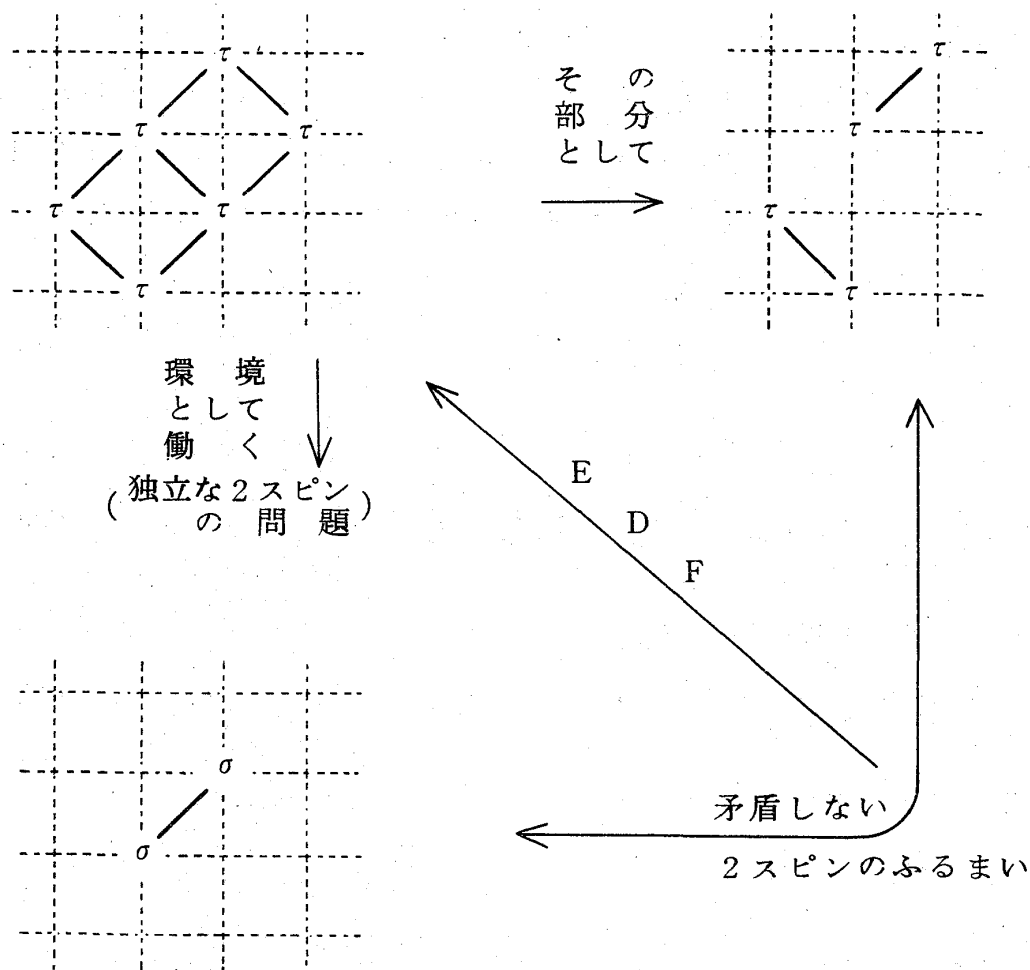
閉じた図形を開くときの EDF を求める式は一般に連立高次代数方程式になる。

この EDF が直観的に理解しやすい点もこの近似の特色であり，実際の計算では変分にさかのぼる必要はなく，EDF から出発すればよい。

§ 5 第二近似

第二近似としては 2.n. の関係にある 2 スピンのふるまいまでつじつまをあわせる。この近似のプロセスを第 4 図に図式化する。

注目する 2 スピンの環境を作る 6 スピンの 24 種類 $2^6 = 64$ 通りの状態の実現比から，2 通り — (i) その部分として，及び (ii) それを環境として独立にふるま



第 4 図

う注目する 2 スピン — の径路から求めた 2 スピン 3 状態の実現比が一致するようにする。このとき 1 スピンのふるまいは自動的につじつまがあう。

2 個及び 6 個のスピンの実現比は第 5 図のように y_i ($i=1, \dots, 3$), w_i ($i=1, \dots, 24$) と呼ぶと, Appendix で求めるが, $\ell n C$ は

$$\ell n C = 3(z_1 \ell n z_1 + \dots) - (x_1 \ell n x_1 + \dots) - 2(w_1 \ell n w_1 + \dots) \quad (37)$$

となる。この 6 スピンの各スピンは全てが互に対等な関係にはないから、例えば z_2 を w で表わす式は 2 通りできる。しかし、 w を 2 つの正方形に分解するのは閉じた図形を開くことにはならないので、§ 4 での説明のように EDF は簡単で、象徴的に書くと

$$w = \frac{z \times z}{y} \quad (38)$$

というように、 y と z だけで書ける。
この式は 6 点図形を 2 個の正方形と共通部分である対に分解し、共通部分は重複して算えたので割るというように解釈できる。その結果 C は


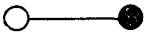
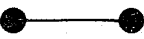
$$\begin{aligned} \ln C = & 2[y_1 \ln y_1 + \dots] \\ & - (x_1 \ln x_1 + \dots) \\ & - (z_1 \ln z_1 + \dots) \end{aligned} \quad (39)$$

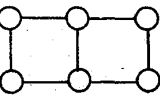
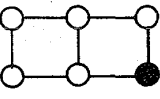
という K 近似のエントロピーと同じような形になる。Lagrange 法で変分したものは、正方形を 4 辺に分ける ED F , p/D , $1/D$, q/D を使って

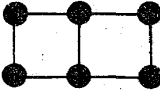
$$\left\{ \begin{aligned} z_1 &= p^4 \operatorname{ch} 4K/D^4 \\ z_2 &= p^2 \operatorname{ch} 2K/D^4 \\ z_3 &= pq/D^4 \\ z_4 &= 1/D^4 \\ z_5 &= q^2 \operatorname{ch} 2K/D^4 \\ z_6 &= q^4 \operatorname{ch} 4K/D^4 \\ D^4 &= (p^4 + q^4) \operatorname{ch} 4K + 4(p^2 + q^2) \operatorname{ch} 2K + 4pq + 2 \end{aligned} \right. \quad (40)$$

と書ける。また、

$$\left\{ \begin{aligned} y_1 &= z_1 + 2z_2 + z_3 \\ y_2 &= z_2 + z_3 + z_4 + z_5 \\ y_3 &= z_6 + 2z_5 + z_3 \\ x_1 &= y_1 + y_2 \end{aligned} \right.$$

対	確率	多重度
(1) 	y_1	1
(2) 	y_2	2
etc.		
(3) 	y_3	1

6スピ	確率	多重度
(1) 	w_1	1
(2) 	w_2	4
等		

(24) 	w_{24}	1
---	----------	---

第 5 図

$$\left\{ \begin{array}{l} x_2 = y_3 + y_2 \\ x_1 + x_2 = 1 \end{array} \right. \quad (41)$$

の関係があり，磁化 m は (14) に相当して，

$$m D^4 = (p^4 - q^4) \operatorname{ch} 4K + 2(p^2 - q^2) \operatorname{ch} 2K \quad (42)$$

と表わせる。

さて，1.n. の4個の τ が z_i 状態のときの1個の σ スピンの状態を $x_1^{(i)}$ ， $x_2^{(i)}$ ($i=1, \dots, 6$) それに対応する磁化を

$$m_{[i]} = x_1^{(i)} - x_2^{(i)}$$

と書けば

$$\left\{ \begin{array}{ll} x_1^{(1)} = (1 + \operatorname{th} 4K) z_1 / 2, & x_2^{(1)} = (1 - \operatorname{th} 4K) z_1 / 2, \\ x_1^{(2)} = (1 + \operatorname{th} 2K) z_2 / 2, & x_2^{(2)} = (1 - \operatorname{th} 2K) z_2 / 2, \\ x_1^{(3)} = z_3 / 2, & x_2^{(3)} = z_3 / 2, \\ x_1^{(4)} = z_4 / 2, & x_2^{(4)} = z_4 / 2, \\ x_1^{(5)} = (1 - \operatorname{th} 2K) z_5 / 2, & x_2^{(5)} = (1 + \operatorname{th} 2K) z_5 / 2, \\ x_1^{(6)} = (1 - \operatorname{th} 4K) z_6 / 2, & x_2^{(6)} = (1 + \operatorname{th} 4K) z_6 / 2, \\ \\ m_{[1]} = z_1 \operatorname{th} 4K \\ m_{[2]} = z_2 \operatorname{th} 2K \\ m_{[3]} = m_{[4]} = 0 \\ m_{[5]} = -z_5 \operatorname{th} 2K \\ m_{[6]} = -z_6 \operatorname{th} 4K \end{array} \right. \quad (43)$$

また環境の正方形の一辺が y_i ($i=1, \dots, 3$) のときの σ スピンの2状態についても同様に， $x_1^{(i)}$ ， $x_2^{(i)}$ ($i=1, 3$)，それに対応する磁化を

$$m_{\underline{1}} = x_{\underline{1}}^{(1)} - x_{\underline{2}}^{(1)}$$

と書いて

$$\left\{ \begin{array}{l} x_j^{(1)} = x_j^{(1)} + 2 x_j^{(2)} + x_j^{(3)} , \\ x_j^{(2)} = x_j^{(2)} + x_j^{(3)} + x_j^{(4)} + x_j^{(5)} , \\ x_j^{(3)} = x_j^{(6)} + 2 x_j^{(5)} + x_j^{(3)} \\ m_{\underline{1}} = z_1 \operatorname{th} 4K + 2 z_2 \operatorname{th} 2K \\ m_{\underline{2}} = (z_2 - z_5) \operatorname{th} 2K \\ m_{\underline{3}} = -z_6 \operatorname{th} 4K - 2 z_5 \operatorname{th} 2K \end{array} \right. \quad (44)$$

となる。

注目する独立な2個のスピンのふるまいは、これらと、(38)で象徴される関係式から、

$$\left\{ \begin{array}{l} y_1 = \frac{(x_1^{(1)})^2}{y_1} + 2 \frac{(x_1^{(2)})^2}{y_2} + \frac{(x_1^{(3)})^2}{y_3} \\ y_2 = \frac{(x_1^{(1)} x_2^{(1)})}{y_1} + 2 \frac{(x_1^{(2)} x_2^{(2)})}{y_2} + \frac{(x_1^{(3)} x_2^{(3)})}{y_3} \\ y_3 = \frac{(x_2^{(1)})^2}{y_1} + 2 \frac{(x_2^{(2)})^2}{y_2} + \frac{(x_2^{(3)})^2}{y_3} \end{array} \right. \quad (45)$$

このうち独立なのは2つで、(17)に相当する式と

$$y_1 + y_3 - 2 y_2 = \frac{(m_{\underline{1}})^2}{y_1} + 2 \frac{(m_{\underline{2}})^2}{y_2} + \frac{(m_{\underline{3}})^2}{y_3} \quad (46)$$

であり、陽に書くと

$$m D^4 = (p^4 - q^4) \operatorname{sh} 4K + 4(p^2 - q^2) \operatorname{sh} 2K \quad (47)$$

及び

小川 泰

$$\begin{aligned}
 & (p^4 + q^4) \operatorname{ch} 4K - 2 \\
 &= \frac{(p^4 \operatorname{sh} 4K + 2p^2 \operatorname{sh} 2K)^2}{p^4 \operatorname{ch} 4K + 2p^2 \operatorname{ch} 2K + pq} + \frac{2(p^2 - q^2)^2 \operatorname{sh}^2 2K}{(p^2 + q^2) \operatorname{ch} 2K + pq + 1} \\
 &+ \frac{(q^4 \operatorname{sh} 4K + 2q^2 \operatorname{sh} 2K)^2}{q^4 \operatorname{ch} 4K + 2q^2 \operatorname{ch} 2K + pq} \quad (48)
 \end{aligned}$$

である。

まず (42) と (47) から

$$p = q \quad (49)$$

又は

$$\frac{p^2 + q^2}{2} = \frac{2 \operatorname{sh} 2K - \operatorname{ch} 2K}{\operatorname{ch} 4K - \operatorname{sh} 4K} = \frac{1}{2} [e^{6K} - 3e^{2K}] \quad (50)$$

となる。non-magnetic な (49) のとき, (48) は

$$\begin{aligned}
 & p^6 - (4 \operatorname{ch}^3 2K - 2 \operatorname{ch}^2 2K - 6 \operatorname{ch} 2K + 1) p^4 \\
 & - (6 \operatorname{ch}^2 2K - 5) p^2 - (2 \operatorname{ch} 2K + 1) = 0 \quad (51)
 \end{aligned}$$

となって, 転移点は (50) で $p = q$ とおいた式と連立させて求め, 整理すると三次方程式

$$e^{6K_c} - 2e^{4K_c} - e^{2K_c} + 1 = 0 \quad (52)$$

となって解析的に求まる。

$$\left\{ \begin{aligned} e^{2K_c} &= \frac{2}{3} \left[1 + \sqrt{7} \cos \left(\frac{1}{3} \cos^{-1} \frac{1}{\sqrt{28}} \right) \right] = 2.24698 \\ t_c &\equiv 1/4K_c \equiv k_B T_c / 4J = 0.617 \end{aligned} \right. \quad (53)$$

他の近似による転移点との比較を第 1 表に掲げた。⁶⁾

$T > T_c$ の状態は (51) 式, $T < T_c$ については (48) と (50) 式から求まるが詳しくは述べない。結果は K 近似の結果と余り変わらず, critical exponent も変わらないようである。自発磁化の温度依存性のみ第 6 図に示しておく。

第 1 表

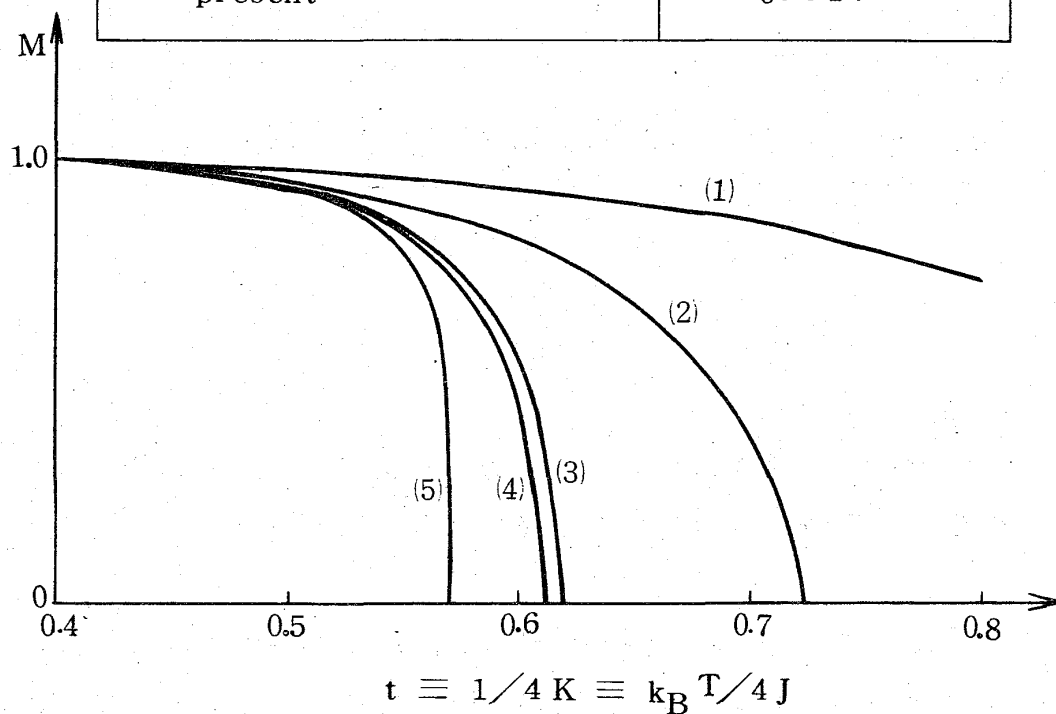
正方格子の転移点⁶⁾

近 似	t_c
分 子 場	1.000
Mamada - Takano ²⁾	0.773
Zernike ⁷⁾	
Bethe 第一 ³⁾	
Rushbrooke-Scoins ⁸⁾	0.721
Bethe 第二 ³⁾	0.657
Kikuchi ⁴⁾	0.656
厳 密 解	0.606
<hr/>	
present	0.567

$$t_c \equiv \frac{1}{zK_c}$$

$$\equiv \frac{k_B T_c}{zJ},$$

$$z = 4$$



第 6 図 自発磁化の温度依存性

- (1) 分子場近似
- (2) Bethe 第一近似
- (3) present
- (4) Kikuchi 近似
- (5) 厳密解

sc の場合は陵で接した 2 個の正八面体, bcc の場合は面で接した 2 個の立方体を環境とする 2.n. の 2 スピンを問題にするが, t_c の比較に留める。(第 2 表)。bcc では K 近似の結果より良い。

第 2 表

sc 及び bcc の転移点⁶⁾

近 似	sc (z=6)	bcc (z=8)
分 子 場	1.000	1.000
Bethe 第一 ³⁾	0.822	0.869
Bethe 第二 ³⁾	0.791	?
Rushbrooke - Scoins ⁸⁾	0.794	0.835
Kikuchi ⁴⁾	0.768	0.844
高温展開	0.752	0.794
present	0.782	0.834

$$t_c \equiv 1/z K_c \equiv k_B T / z J$$

§ 6 む す び

§ 2 での説明では, 分配関数を求める立場から述べたが, 実際の計算では § 4 の EDF の存在を初めから前提して出発した方が直観的であり, 便利でもある。

結果は格子によって K 近似との優劣が異なるが, ほぼ同程度の近似といえよう。

冒頭に掲げた近似の基本精神は多体問題一般, 特に「intra-subsystem interaction のない subsystem に分割可能な系」に広く応用できると思われる, 独立粒子像を拡張して相関を扱う可能性を与えるものと考えられる。動的な場合にも, また量子論的な場合にも有用であろう。

また EDF も液体論での Kirkwood の superposition 近似⁹⁾や多体グリーン

関数の decoupling の改良や基礎づけに何らかの示唆を与えているように思われる。

Appendix Hijmans - de Boer の方法の説明と その拡張

Kikuchi 近似の考え方は、格子の基本図形と呼ぶ小部分（その第一近似では 1.n. 対，第二近似では一辺が 1.n. の正方形）のアンサンブルを考え，その小部分で元の格子をおおうときに矛盾なしに各部分がそのアンサンブルと同じ正しい分布になるように組み合わせを計算することである。

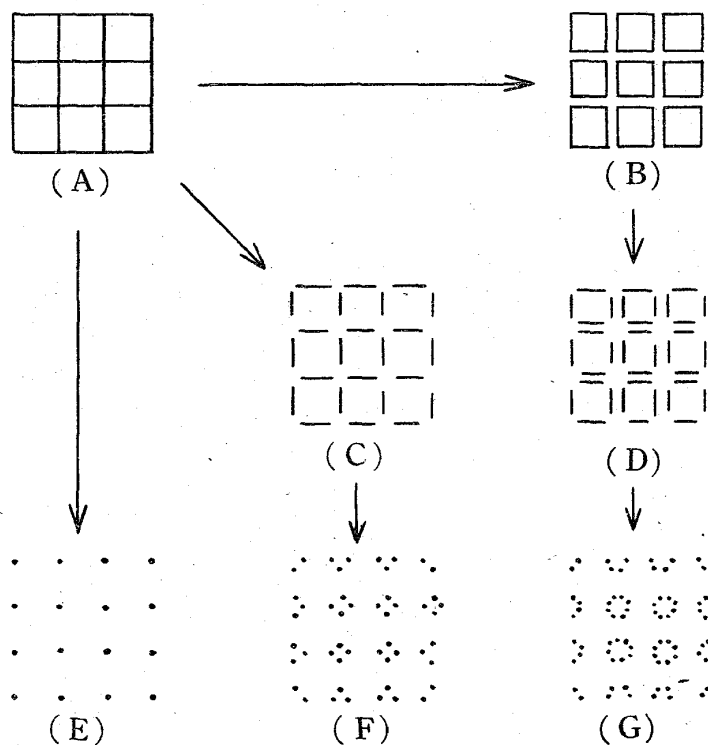
HdB はこの組み合わせの計算法を K とは別の形で一般化した。まず基本的な考え方を正方格子について述べる。

第一近似は第 7 図の A → E という径路及び A → C → F という径路で考えた点の分布 E と F が一致するように重複をさけて計算し，Takagi の方法¹⁰⁾の別の表現でもあり，Bethe 近似と一致する。第二近似も同様に対の分布 C と D，点の分布 E と F と G が一致するようにする。

HdB によると格子全体からあらゆる方法で基本図形をとり出す際にできる重複部分を第 8 図のようにとり出して図形列を作り，図形 (n)

中の図形 (m) の個数を $\alpha^{(m)(n)}$ ，図形 (m) と同じ図形の数（例えば縦形と横形）を $x^{(m)}$ とするとき

$$x^{(m)} = \sum_{n=1}^{\ell} \alpha^{(m)(n)} y_{(\ell)}^{(n)} \quad (\text{A } 1)$$



第 7 図

小川 泰
から $y_{(\ell)}^{(m)}$ を求めると、図形
(ℓ) を基本図形とする近似の
エントロピーは

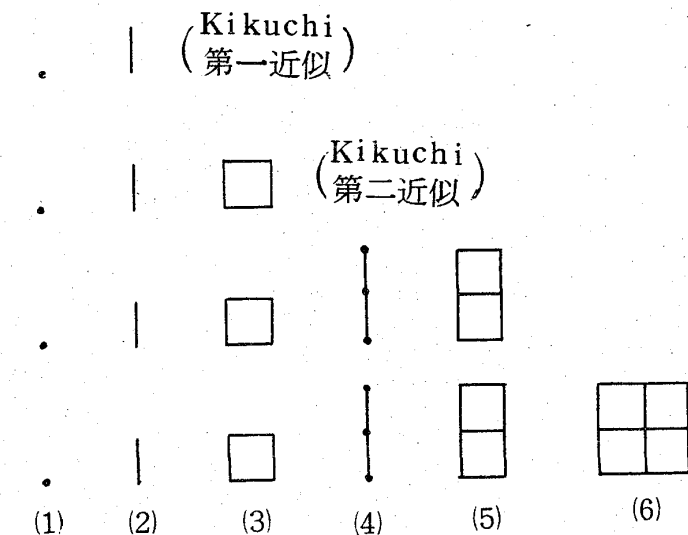
$$S = -L k_B \sum_{n=1}^{\ell}$$

$$y_{(\ell)}^{(n)} \sum_i \lambda_i^{(n)} P_i^{(n)} \ell \ln p_i^{(n)}$$

(A 2)

と書ける。但し L は格子点数、
 $P_i^{(n)}$ は図形 (n) の状態 i の
実現比で、 $\lambda_i^{(n)}$ は対称性から
来るその多重度。

上の場合の例を第 3 表に示した。



第 8 図

第 3 表

$\begin{matrix} (n) \\ (m) \end{matrix}$	$\alpha^{(m)(n)}$						$x^{(m)}$	$y_{(2)}^{(m)}$	$y_{(3)}^{(m)}$	$y_{(5)}^{(m)}$	$y_{(6)}^{(m)}$
	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)					
(1)	1	2	4	3	6	9	1	-3	1	-1	0
(2)	0	1	4	2	7	12	2	2	-2	4	0
(3)	0	0	1	0	2	4	1		1	-3	1
(4)	0	0	0	1	2	6	2			-2	0
(5)	0	0	0	0	1	4	2			2	-2
(6)	0	0	0	0	0	1	1				1

われわれの近似ではこの図形列の全てをとらず、われわれの近似での基本図形であるつじつまをあわせようとする図形（第一近似では第 8 図の (1)，第二近似では (1) と (2)）と、それらの環境となる環境図形（第一近似では第 8 図の (3)，第二近似では (3) と (5)）のみの図形列だけから求めた $y_{(\ell)}^{(m)}$ を (A 2) 式に代入したものを (8) 式の $\ell \ln C$ とする。

これは第一近似では図形(2)，第二近似では(4)についての重複や正しい分布に関心が支払われていないことであるが，われわれの近似では基本図形の他に，「飛び越えて」環境図形をも考慮したと解すべきである。

(12)，(39)式はこの方法によって第4表のようにして $y_{(\ell)}^{(m)}$ を求めて計算した。

第 4 表

第 一 近 似

	$\alpha^{(m)(n)}$	$x^{(m)}$	$y^{(m)}$
$(m) \backslash (n)$	(1) (2)		
(1)	1 z	1	1-z
(2)	0 1	1	1

第 二 近 似

	$\alpha^{(m)(n)}$	$x^{(m)}$	$y^{(m)}$
$(m) \backslash (n)$	(1) (2) (3) (5)		
(1)	1 2 4 6	1	1
(2)	0 1 4 7	2	0
(3)	0 0 1 2	1	-3
(5)	0 0 0 1	2	2

References

- 1) 小川 泰，小倉久和，種村正美，物性研究 16 (1971)，B 37.
(6月号)基研研究会報告「統計力学における基礎的諸問題」
小川 泰，小倉久和，日本物理学会1971年春の分科会予稿集 2，152.
- 2) 間々田博司，高野文彦，物性研究 8 (1967)，181.
H. Mamada & F. Takano, J. Phys. Soc. Japan 25 (1968)，675.
- 3) H. A. Bethe, Proc. Roy. Soc. A 150 (1935)，552.
- 4) R. Kikuchi, Phys. Rev. 81 (1951)，988. M. Kurata,
R. Kikuchi & T. Watari, J. Chem. Phys. 21 (1953)，434.
- 5) J. Hijmans & J. de Boer, Physica 21 (1955)，471.
- 6) C. Domb, Adv. in Phys. 9 (1960)，149.
M. E. Fisher, Rep. Progr. Phys. 30 (1967)，615.
小口武彦，磁性体の統計理論(1970).

小川 泰

- 7) F. Zernike, Physica 7 (1941), 565.
- 8) G. S. Rushbrooke & H. I. Scoins, Proc. Roy. Soc. A 230 (1955), 74.
- 9) J. G. Kirkwood, J. Chem. Phys. 3 (1935), 300.
- 10) Y. Takagi, Proc. Phys-Math. Soc. Japan 23 (1941), 44.